



基于氧化铪缓冲层实现高效反式结构钙钛矿太阳能电池

宁志军

上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 201210

E-mail: ningzhj@shanghaitech.edu.cn

Ytterbium oxide buffer for high-performance inverted perovskite solar cells

Zhijun Ning

School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China

E-mail: ningzhj@shanghaitech.edu.cn

doi: [10.1360/TB-2024-0148](https://doi.org/10.1360/TB-2024-0148)

为了实现碳中和, 能源结构的转型势在必行. 太阳能转化的电能终端能源消费中的比重逐年增长, 离不开太阳能电池技术的不断革新. 其中, 基于金属卤化物钙钛矿的太阳能电池经过10多年的迅猛发展, 其光电转换效率已经可以与传统晶硅太阳能电池相媲美, 在未来大规模的产业化进程中也备受寄予厚望. 钙钛矿太阳能电池(perovskite solar cells, PSCs)按器件结构主要分为两类: 一类是正置结构电池, 一类是反式结构电池. 其中, 反式结构电池由于稳定性高、与叠层器件结构兼容、成本低等优势, 成为当下国内外的研究热点^[1,2]. 反式结构电池的关键功能层包括电极、P型和N型电荷输运层、钙钛矿层和界面缓冲层. 最近几年, 基于界面钝化、钙钛矿组分工程等技术以及新型电荷输运层开发, 反式结构电池性能不断提升.

然而, 钙钛矿太阳能电池的界面存在着严重的物质扩散和离子迁移问题, 这已经在很大程度上限制了电池的光电转换效率和工作稳定性^[3,4]. 为了解决这些挑战, 研究人员通常通过在电荷输运层和金属顶电极之间引入多功能缓冲层来加以缓解.

目前, 这类多功能缓冲层材料主要包括有机半导体浴铜灵(bathocuproine, BCP)或者金属氧化物氧化锡(SnO_x). 然而, BCP存在着热稳定性不佳的问题; 而SnO_x则需要耗时且价格昂贵的原子层沉积(atomic layer deposition, ALD)技术来制备. 除了BCP和SnO_x界面缓冲层, 国内外研究团队也报道了一些新型界面缓冲层, 包括铋^[5]、铬^[6]、氮化锆^[7]等. 研究发现, 使用这些新型缓冲层可以显著提高电池的稳定性. 然而, 相比于钙钛矿层以及电荷输运层的研究, 针对反式结构钙钛矿太阳能电池界面缓冲层的研究总体比较滞后, 迫切需要开

发一种稳定性出色、制备工艺简单且电荷输运特性良好的新型界面缓冲层材料. 考虑到这些因素, 近期北京大学朱瑞教授团队基于对非晶态金属氧化物半导体材料特性的深入了解, 结合材料氧化动力学和物化性质的综合分析, 最终选择了可用物理气相沉积技术制备的 α -YbO_x来构建反式结构钙钛矿太阳能电池的电子传输层(electron transport layer, ETL)和金属电极之间的界面缓冲层, 实现了超过25%的电池光电转换效率, 同时器件的工作稳定性得到显著提升. 相关研究成果发表于Nature^[8].

为了揭示 α -YbO_x界面缓冲层的电荷输运特性, 研究团队联合开展深入研究, 发现 α -YbO_x在费米能级附近存在高浓度的Anderson-Mott局域态, 这正是构筑基于量子局域态调控电荷输运的高稳定界面的关键(图1(a)). 基于 α -YbO_x界面缓冲层所制备的反式结构钙钛矿太阳能电池(图1(b)), 研究团队经过系统优化, 实现了超过25%的电池光电转换效率, 该数值突破了基于金属氧化物缓冲层电池25%的光电转换效率瓶颈. 更进一步, 研究团队将该缓冲层材料应用于基于不同带隙钙钛矿光吸收层的太阳能电池, 发现该材料具有优异的普适性. 具体来说, 基于窄带隙(1.54 eV)钙钛矿的太阳能电池获得了25.2%的最高光电转换效率(第三方认证值为25.09%)(图1(c)); 基于中等带隙(1.61 eV)和宽带隙(1.77 eV)钙钛矿的太阳能电池分别获得了22.1%和20.1%的最高光电转换效率(图1(d, e)).

在可靠性和工艺成本方面, 研究团队对比了 α -YbO_x界面缓冲层和常规界面缓冲层. 在可靠性方面, 相较于常规基于BCP界面缓冲层的电池, 基于 α -YbO_x界面缓冲层的电池表现出了更优异的稳定性, 达到了基于ALD-SnO_x界面缓冲层电

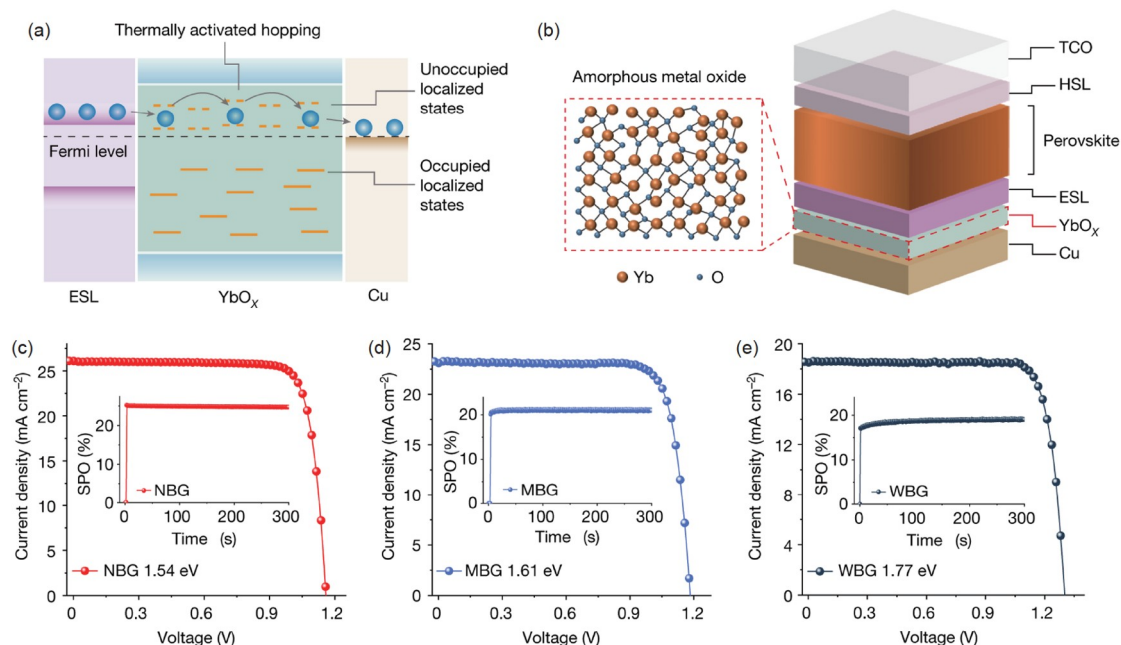


图 1 (网络版彩色)载流子运输机制和太阳能电池性能^[8]. (a) 载流子在电子传输层/ α -YbO_x/Cu界面的运输示意图. (b) 钙钛矿太阳能电池结构示意图. (c~e) 基于不同带隙钙钛矿的太阳能电池性能

Figure 1 (Color online) Carrier transport mechanism and photovoltaic performance^[8]. (a) Schematic of the charge-carrier transport across the ESL/ α -YbO_x/Cu interface. (b) Schematic of the device configuration. (c~e) Photovoltaic performance of the PSCs with various bandgaps

池的同等水平. 研究团队进一步通过飞行时间二次离子质谱和光电子能谱等表征技术来探究电池稳定性提升的原因, 发现 α -YbO_x界面缓冲层可以显著抑制物质扩散与离子迁移; 同时, 即便 α -YbO_x与钙钛矿直接接触也不会发生化学反应, 这些结果揭示了电池稳定性提升的机理. 在工艺成本方面, α -YbO_x界面缓冲层从物理气相沉积到高真空原位氧化时间尺度仅为分钟级, 成功避免了使用ALD技术制备SnO_x耗时的问题, 可极大地提升大规模钙钛矿太阳能电池生产的效率. 此外, 尽管 α -YbO_x是一种稀土金属氧化物, 但其价格显著低于BCP和制备ALD-SnO_x的四(二甲氨基)锡前驱体, 这更有利于

降低钙钛矿太阳能电池的制备成本.

综上所述, 该工作针对钙钛矿太阳能电池内存在的物质扩散和离子迁移问题, 创新性采用稀有金属氧化物 α -YbO_x界面缓冲层, 并证明了 α -YbO_x界面缓冲层在构筑高效稳定反式结构钙钛矿太阳能电池中具有显著的优势, 这为开发新型界面缓冲层提供了新思路. 这项工作也加深了领域内对反式结构钙钛矿太阳能电池界面缓冲层功能和材料设计的理解和认识. 同时具有廉价、可大规模制备、多功能优势的 α -YbO_x界面缓冲层的开发对于推动钙钛矿光伏领域的发展具有重要的意义.

参考文献

- 1 Zhu R. Inverted devices are catching up. *Nat Energy*, 2020, 5: 123–124
- 2 Li B, Zhang W. Improving the stability of inverted perovskite solar cells towards commercialization. *Commun Mater*, 2022, 3: 65
- 3 Ran C, Xu J, Gao W, et al. Defects in metal triiodide perovskite materials towards high-performance solar cells: origin, impact, characterization, and engineering. *Chem Soc Rev*, 2018, 47: 4581–4610
- 4 Zhang H, Pfeifer L, Zakeeruddin S M, et al. Tailoring passivators for highly efficient and stable perovskite solar cells. *Nat Rev Chem*, 2023, 7: 632–652
- 5 Wu S, Chen R, Zhang S, et al. A chemically inert bismuth interlayer enhances long-term stability of inverted perovskite solar cells. *Nat Commun*, 2019, 10: 1–10
- 6 Kaltenbrunner M, Adam G, Glowacki E D, et al. Flexible high power-per-weight perovskite solar cells with chromium oxide–metal contacts for improved stability in air. *Nat Mater*, 2015, 14: 1032–1039
- 7 Xiao M, Yuan G, Lu Z, et al. Engineering amorphous–crystallized interface of ZrN_x barriers for stable inverted perovskite solar cells. *Adv Mater*, 2023, 35: 2301684
- 8 Chen P, Xiao Y, Hu J, et al. Multifunctional ytterbium oxide buffer for perovskite solar cells. *Nature*, 2024, 625: 516–522